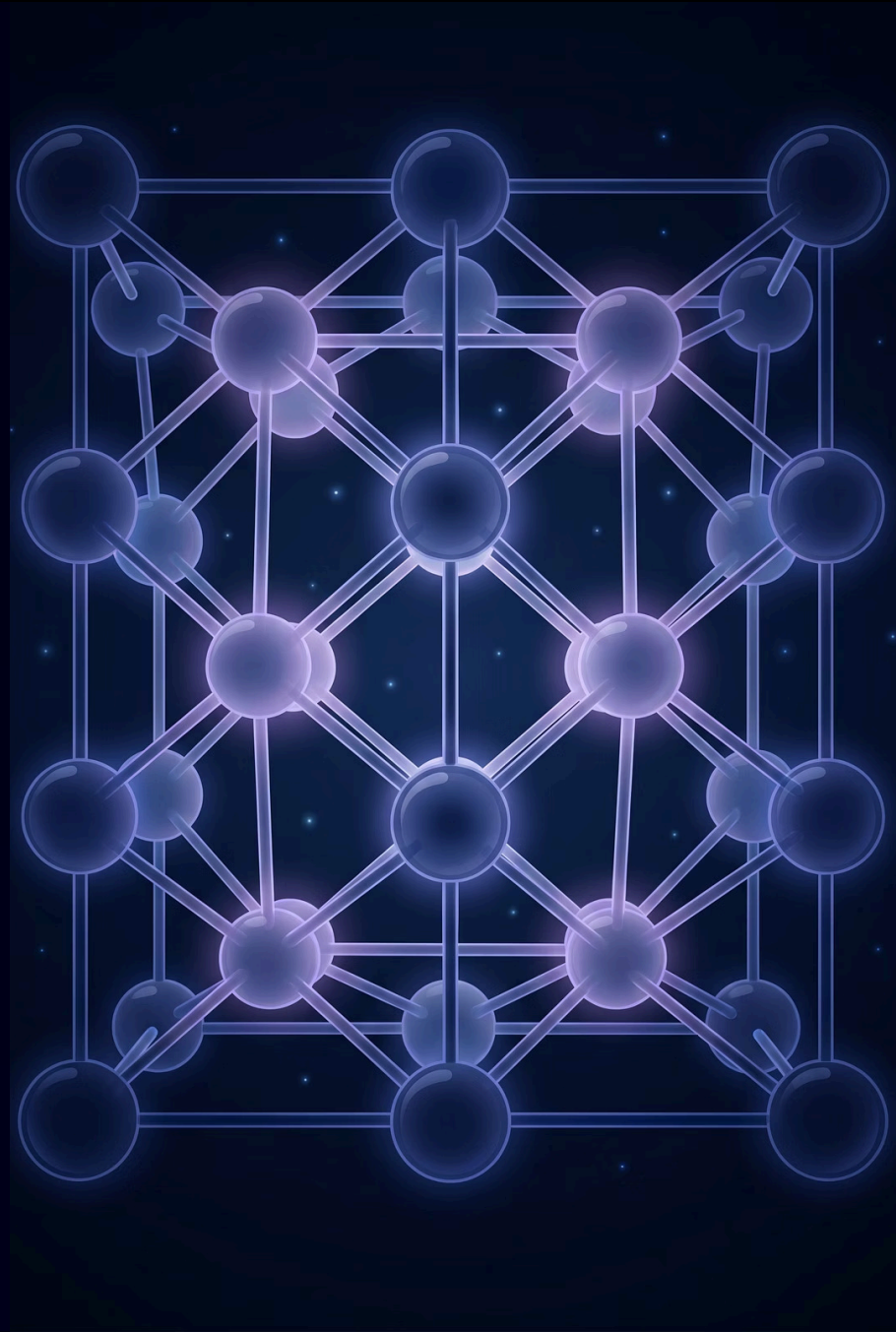
# İsimlendirme ve Sentez: Maddenin Dili ve İnşası

Ders Sunumu

TERADİGMA



# Madde Nedir? Kimya Ne Sorar?

Kimya; maddenin ne olduğunu, nasıl bir araya getirildiğini ve nasıl dönüştürüldüğünü sistematik olarak inceler.

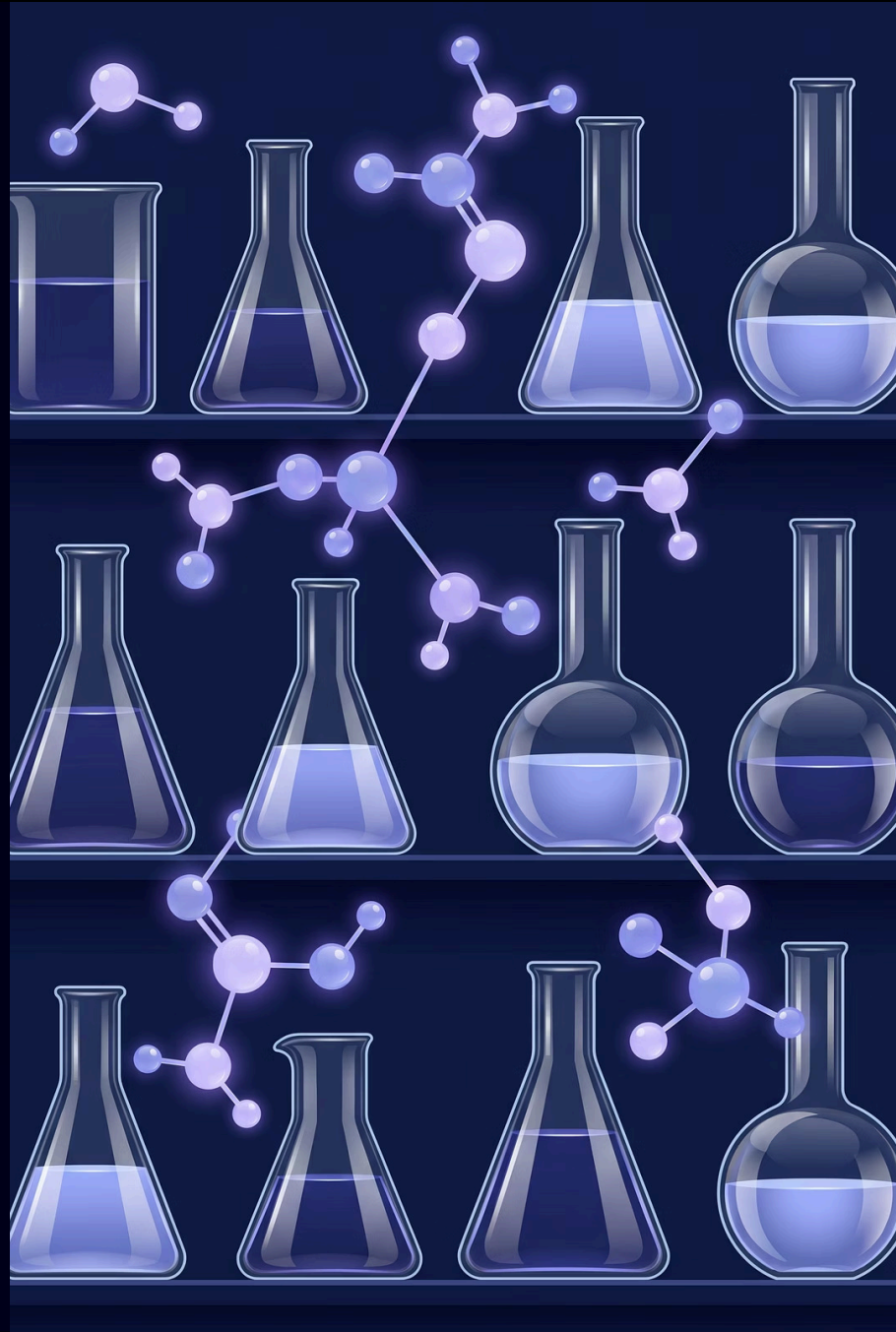
Bu dersin iki ana sorusu:

### Tanımlama ve Adlandırma

Var olan moleküller nasıl **tanımlanır ve adlandırılır?**

### İnşa Etme

Yeni moleküller hangi yöntemlerle **inşa edilir?**



# Raporun Temel Tezi

Madde, rastlantısal çarpışmaların ürünü olan kaotik bir yığın değil; son derece hassas kurallara, geometrik zorunluluklara ve işlevsel hedeflere göre düzenlenmiş, okunmayı bekleyen bir eserdir.

## İsimlendirme

Bu eserin alfabesini ve gramerini çözer.

## Sentez

Bu dili kullanarak yeni yapılar inşa eder.

# Neden Sistematik İsimlendirme Gerekli?

Erken dönemde bileşikler kaynağa, renge veya keşfedene göre adlandırılırdı:

### Sirke Asidi

*acetum* (Latince: sirke) kelimesinden türetilmiştir.

### Formik Asit

*Formica rufa* (kırmızı karınca) damıtılmasından elde edilmiştir.

### Vitriol Yağı

Yağımsı ve camsı görünümünden dolayı bu ismi almıştır.

### Barbitürik Asit

İsmin kökeni hâlâ tartışmalı bir kimya tarihi anekdotudur.

# Kaotik Dönemden Sistematik Gramere

19. yüzyılda sentezlenen molekül sayısı binleri, sonra milyonları aştı.

01

### Sürdürülemezlik

Keyfi isimlendirme sürdürülemez hale geldi.

02

### Gereksinim

İsmin kendisi molekülün yapısını "haber vermeli" gereksinimi doğdu.

03

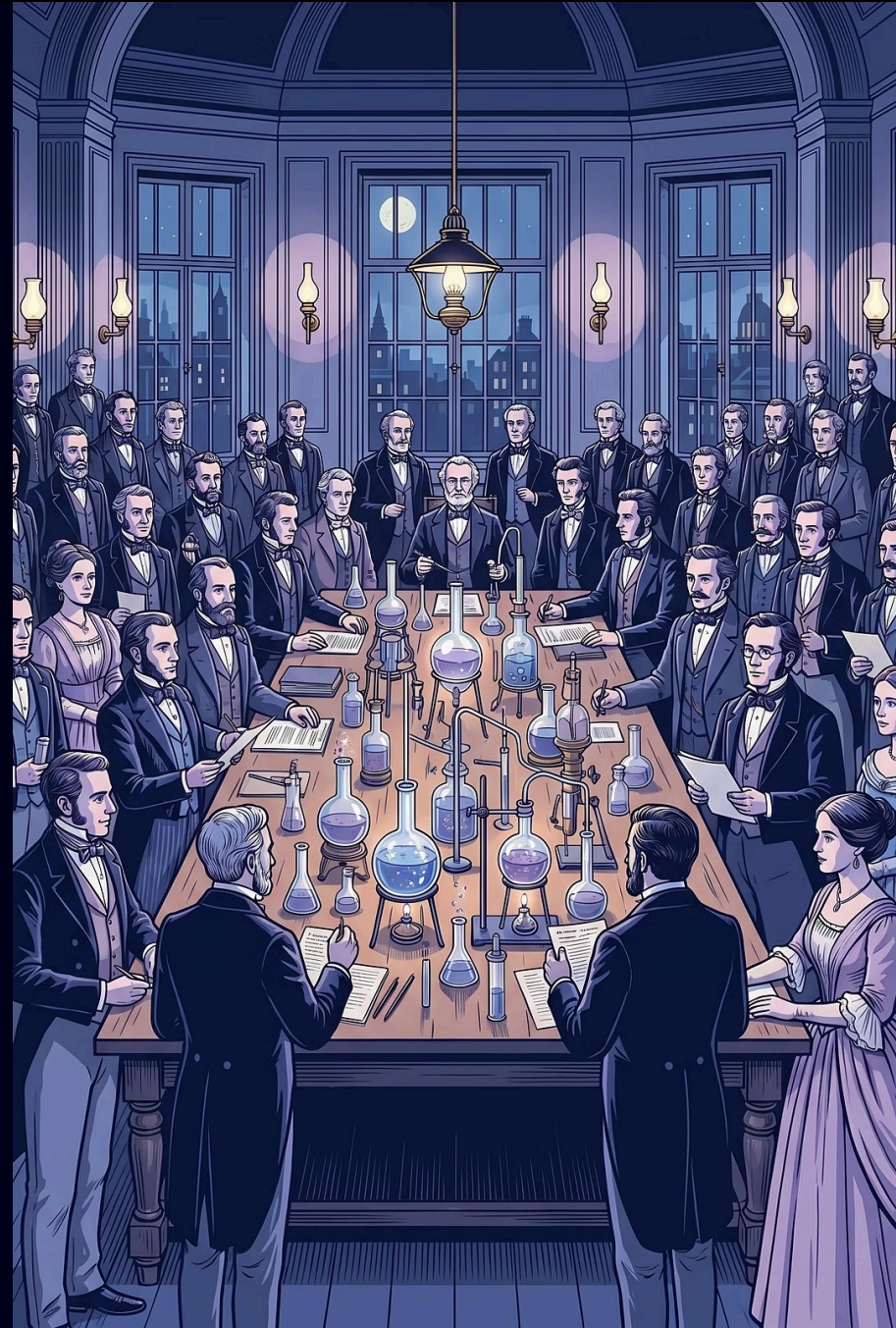
### Cenevre Kongresi

1892'de Cenevre'deki uluslararası kongre ilk adımları attı.

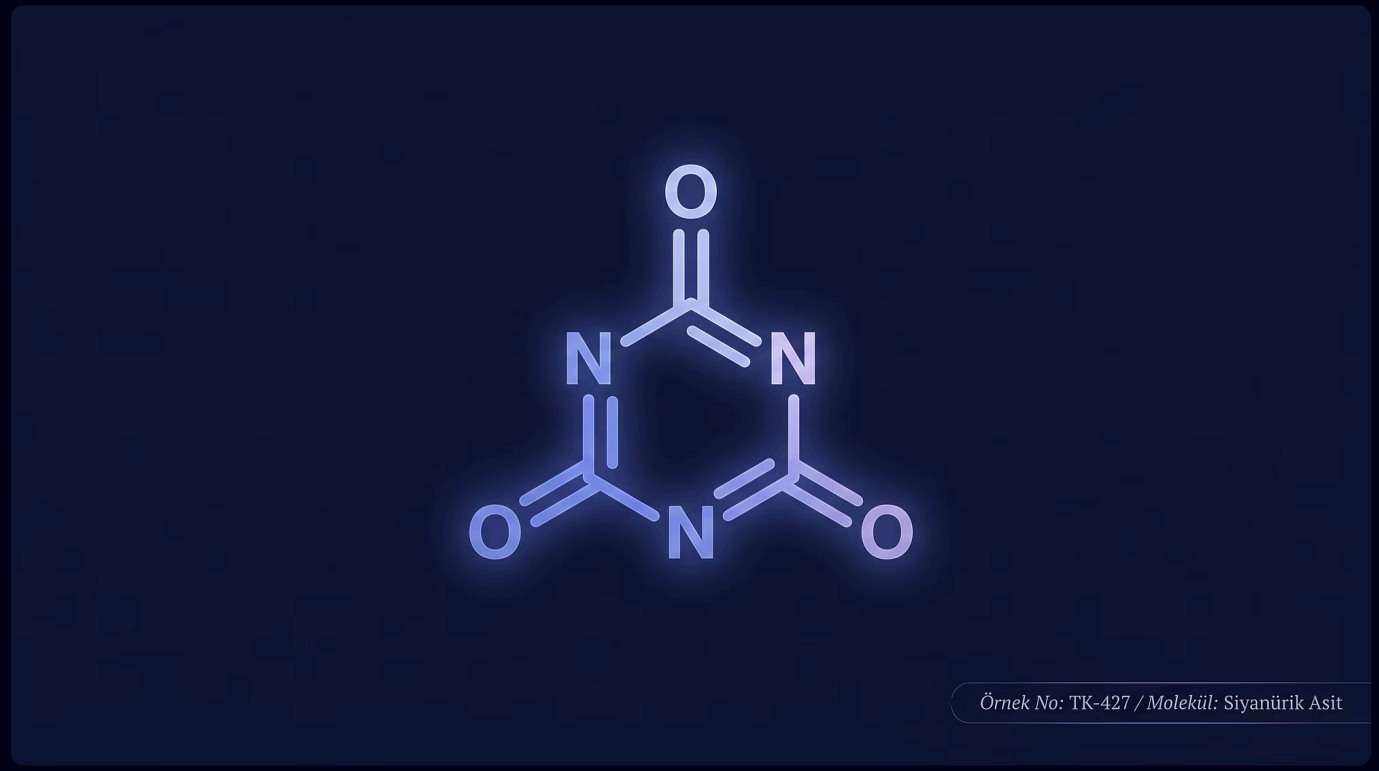
04

### IUPAC Kuralları

Uluslararası Temel ve Uygulamalı Kimya Birliği kuralları oluşturuldu.



# IUPAC'ın Temel Felsefesi




*Örnek No:* TK-427 / *Molekül:* Siyanürik Asit

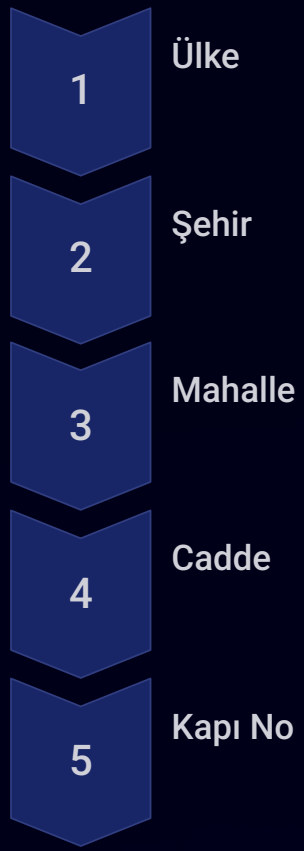
Her kimyasal yapıya tek ve belirsizliğe yer bırakmayan bir isim atanmalıdır.

Aynı şekilde: her isimden tek bir yapı hatasız olarak çizilebilmelidir.

> **Felsefi not:** Milyonlarca farklı molekülün tek bir evrensel gramerle eksiksiz tanımlanabilmesi, maddenin rastlantısal değil; matematiksel bir düzen içinde var olduğunu düşündürür.

# Postacı Analojisi: Moleküler Adresleme

Bir postacı mektubu doğru eve teslim edebilmek için adresi hiyerarşide okur:




IUPAC da aynı mantıkla çalışır — adım adım.

# IUPAC Adımları: Ana Cadde ve Yön

### 1. Ana Caddeyi Bul (Ana Zincir Seçimi)

En uzun karbon zinciri veya en önemli halka yapısı "ana yapı" olarak seçilir. Üzerinde önemli bir fonksiyonel grup varsa daha kısa zincir bile ana cadde sayılabilir.

### 2. Yönü Belirle (Numaralandırma)

Önemli gruplara en kısa sürede ulaşılacak uçtan numaralandırmaya başlanır; lokantlar mümkün olan en küçük sayı olur.

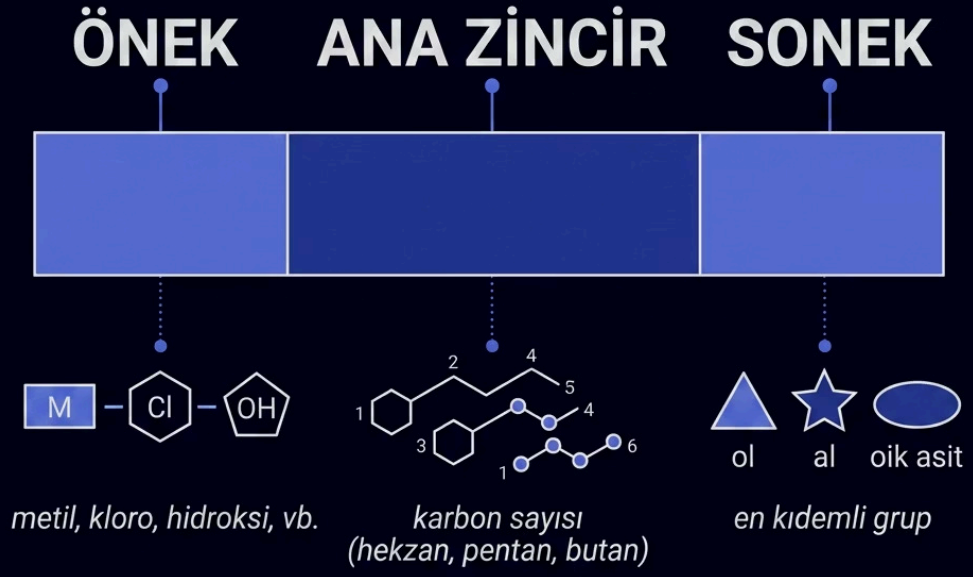
# IUPAC Adımları: Sakinleri Tanımla

### 3. Fonksiyonel Gruplar ve Ekler

- En kıdemli grup (örneğin karboksilik asit) → **sonek** olarak ailenin soyadını belirler
- Daha az kıdemli gruplar (metil, kloro, hidroksi) → **önek** olarak, kapı numarasıyla birlikte yazılır

**Örnek:** 3-metilheksan

- "heksan" → 6 karbonlu ana cadde
- "metil" → yan sokaktaki sakin
- "3" → o sakinin kapı numarası




## ÖRNEK: 3-metilheksan

# Stereokimya: Sağ El ve Sol El Farkı

Atomların bağlanma sırası yetmez; üç boyutlu uzaydaki yönelimleri de tanımlanmalıdır.

### Talidomid örneği:

**(R)-enantiomeri**

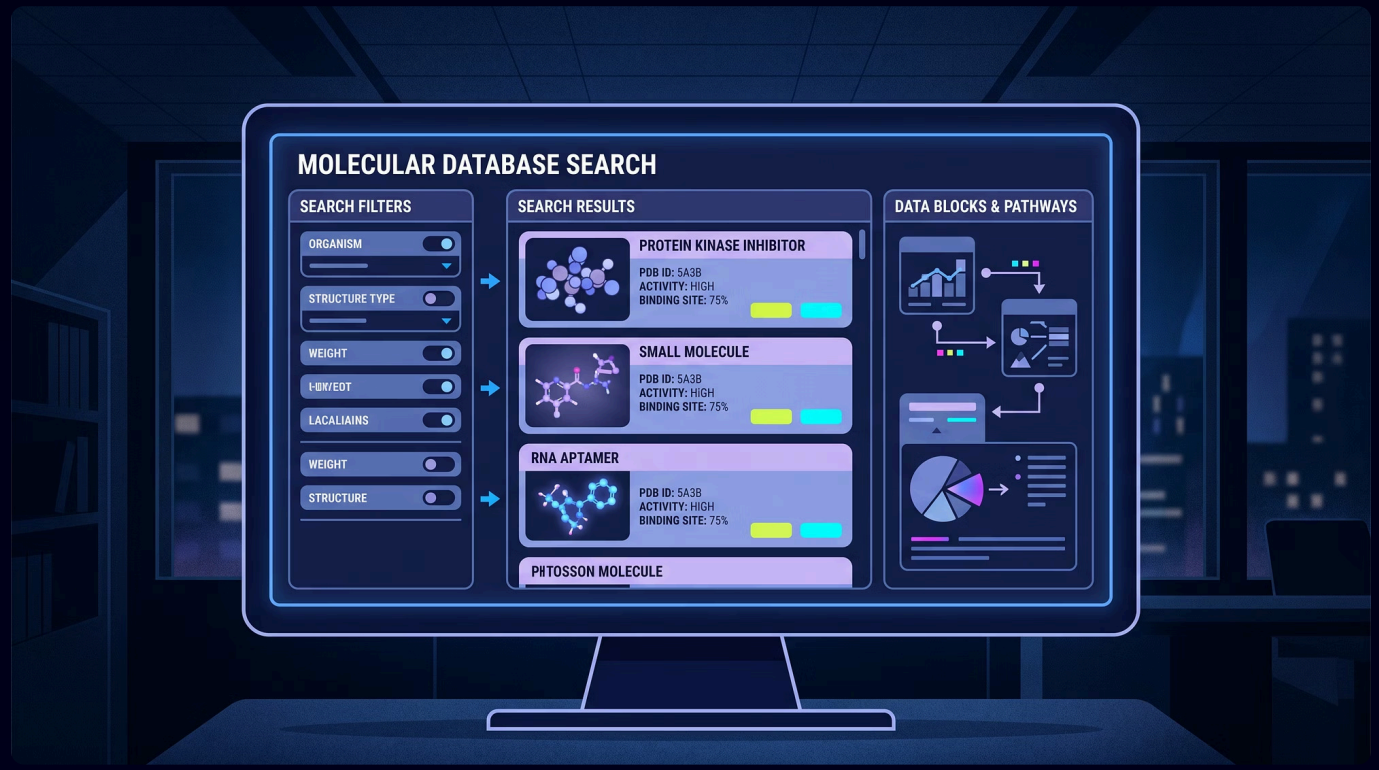
Sabah bulantılarında etkili ilaç olarak kullanılmıştır.

**(S)-enantiomeri**

Ciddi doğum kusurlarına yol açan zehir olarak etki göstermiştir.

> İsimlendirmedeki tek bir harf (R veya S), şifa ile felaket arasındaki farkı belirler. Maddedeki en ufak uzaysal değişim, bu denli büyük sonuçlar doğurabilecek şekilde tasarlanmıştır.

# Dijital Çağda İsimlendirme: Neden Yeni Sistemler Gerekti?

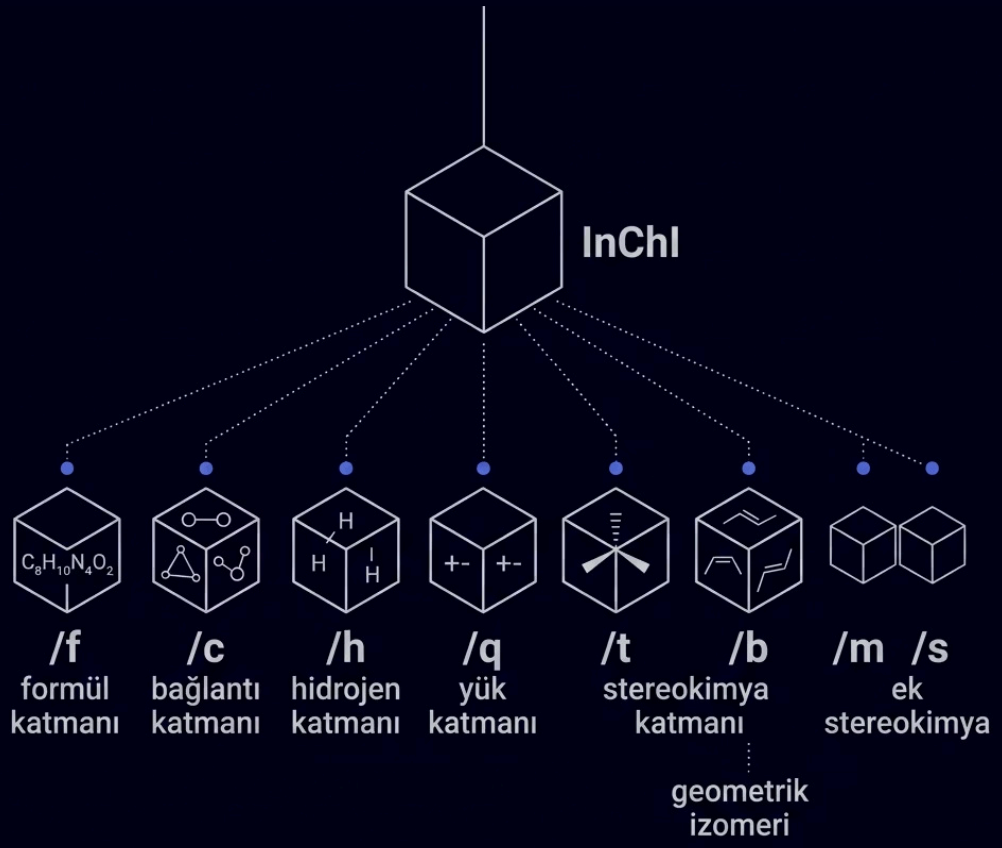



Milyonlarca molekülün bilgisayarlar tarafından taranması ve yapay zeka ile analiz edilmesi gereksinimi doğdu.

İnsan diliyle yazılan IUPAC isimleri bilgisayarlar için yetersiz kaldı.

**Çözüm:** Bilgisayarların "anadilini" konuşan iki yeni standart geliştirildi: **InChI** ve **SMILES**

# InChI: Moleküler Barkod




IUPAC ve NIST tarafından geliştirilen InChI, katmanlardan oluşan bir metin dizisidir.

- /f → formül katmanı
- /c → bağlantı katmanı
- /h → hidrojen katmanı
- /q, /t, /b, /m, /s → yük ve stereokimya katmanları

**InChIKey:** Uzun InChI kodları SHA-256 algoritmasıyla 27 karaktere sıkıştırılır. Örnek — kafeinin InChIKey'i: RYYVLZVUVIJVGH-UHFFFAOYSA-N

InChIKey: RYYVLZVUVIJVGH-UHFFFAOYSA-N (kafein)

# InChI'nin Pratik Kullanımı

Laboratuvar güvenliği ve envanter takibinde kimyasal şişelere InChIKey içeren QR kodları basılır.

Akıllı telefonla taranan bu kodlar; maddenin tüm özelliklerine, güvenlik verilerine ve yapısına saniyeler içinde erişim sağlar.

> Milyonlarca maddeyi anlık sorgulayabilecek bu sistemin arkasında, maddenin matematiksel bir düzen içinde var olması yatmaktadır. Akılsız atomların bu düzeni kendiliğinden üretmesi mümkün müdür?

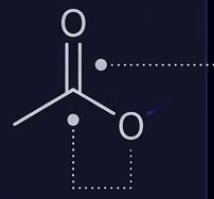
# SMILES: Kimyasal Cümleler

**C, N, O Atomları:** Temel yapılar.

**= Çift Bağ, # Üçlü Bağ.**

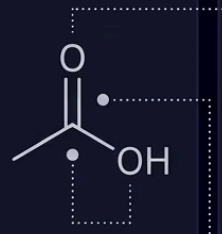
**( ) Dallanmalar:** Zincir yapıları.

**C1CCCCC1 Halkalar:** Siklohekzan örneği.

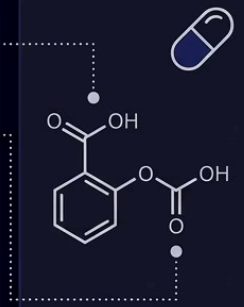



**Asetat Grubu** (CC(=O)O-)

**Benzen Halkası** (c1ccccc1)




**Karboksilik Asit** (-C(=O)O)




**Aspirin:** CC(=O)Oc1ccccc1C(=O)O

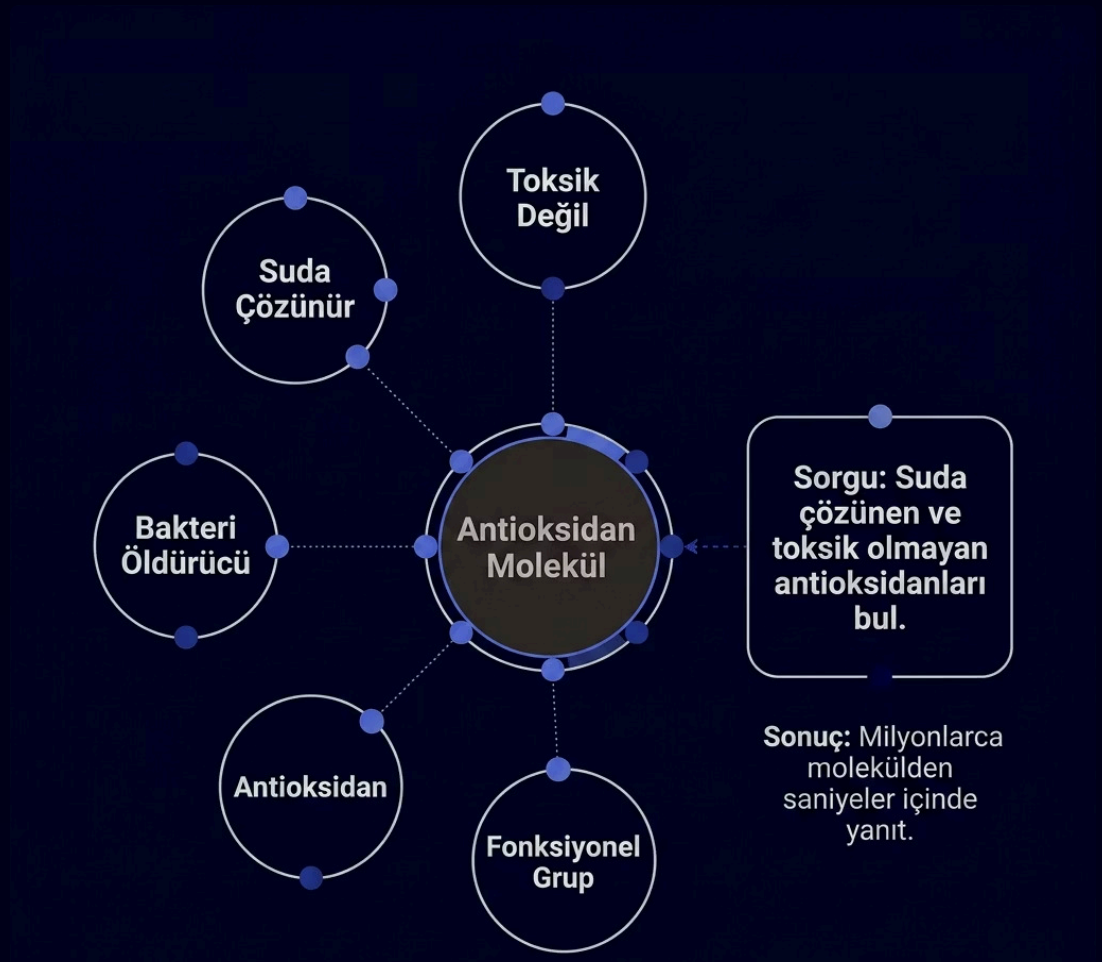
Moleküler yapıyı klavye karakterleriyle metin satırına dönüştüren sistem:

- Atomlar sembolleriyle yazılır: C, N, O (hidrojenler gizlidir)
- Çift bağ → = | Üçlü bağ → #
- Dallanmalar → ( ) içinde
- Halkalar → açılış ve kapanış atomuna aynı numara (C1CCCCC1 → siklohekzan)

**Örnek:** Aspirin → CC(=O)Oc1ccccc1C(=O)O

2025 literatüründe yapay zeka modelleri bu SMILES "cümlelerini" okuyarak yeni ilaç moleküllerinin özelliklerini daha sentezlenmeden tahmin edebilmektedir.

# C3PO Ontolojileri: Anlamlandırma Devrimi




Antioksidan molekül özelliklerinin grafik ontolojisi.

Molekülleri yapılarının ötesinde, fonksiyonlarına ve ilişkilerine göre sınıflandıran "akıllı sözlükler"dir.

- "Bu molekül bir alkoldür", "Suda çözünür", "Bakteri öldürücüdür" bilgileri mantıksal ağlarla bağlanır
- Örnek sorgu: "Suda çözünen ve toksik olmayan tüm antioksidanları bul" → milyonlarca molekül arasından saniyeler içinde yanıt

İsimlendirmenin ötesinde bir **anlamlandırma** devrimidir.

# Kimyasal Bağlar: Maddenin İnşaat Harcı

Sentezi anlamak için önce atomların nasıl bir arada tutunduğunu anlamak gerekir.

Atomlar, Coulomb yasası ve kuantum mekaniğine tabi olarak en düşük enerji seviyesine ulaşmak üzere diğer atomlarla etkileşime girerler.

Bu etkileşim dört farklı bağ türünde tezahür eder.

### İyonik Bağ

Elektron transferi

### Kovalent Bağ

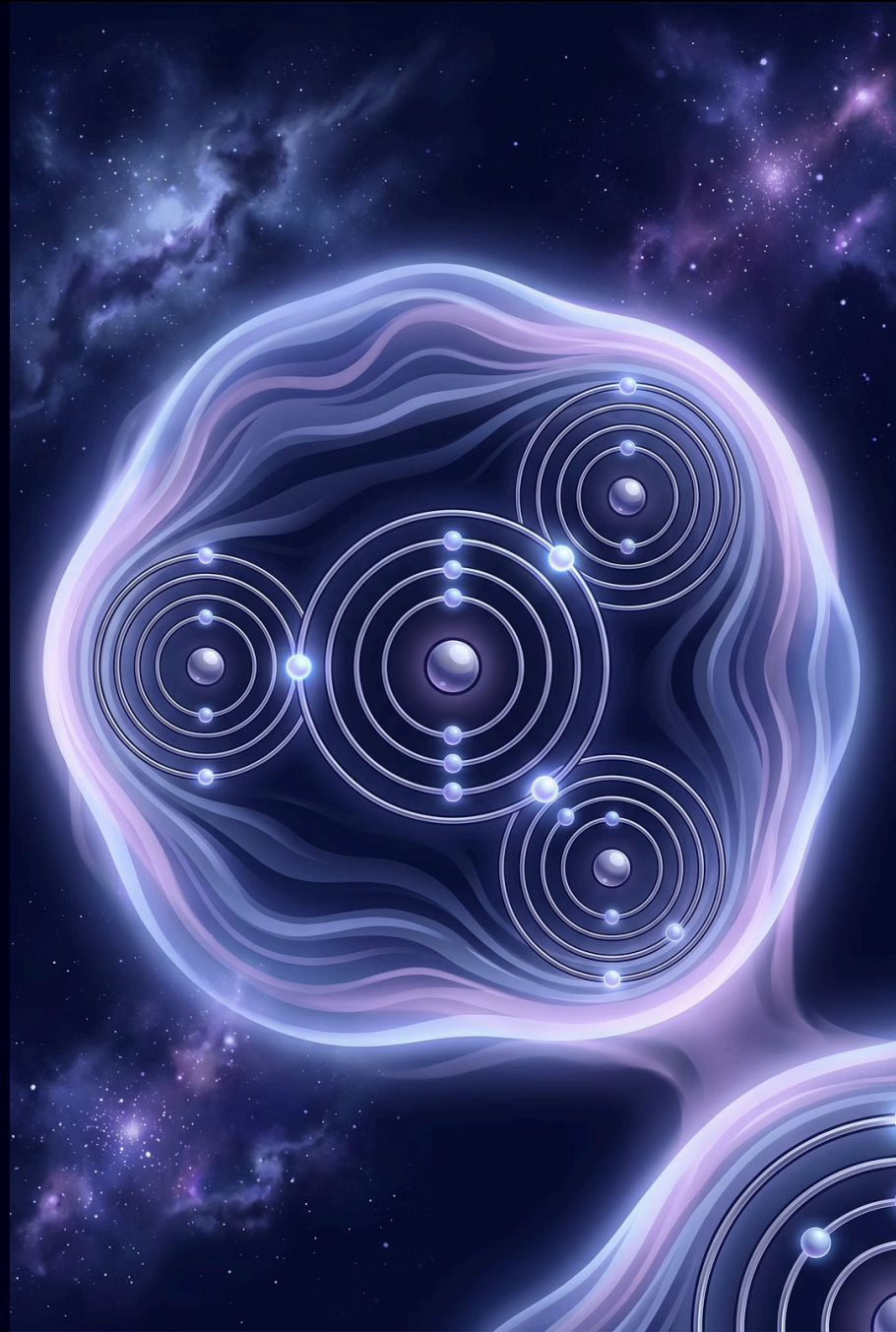
Elektron ortaklaşması

### Metalik Bağ

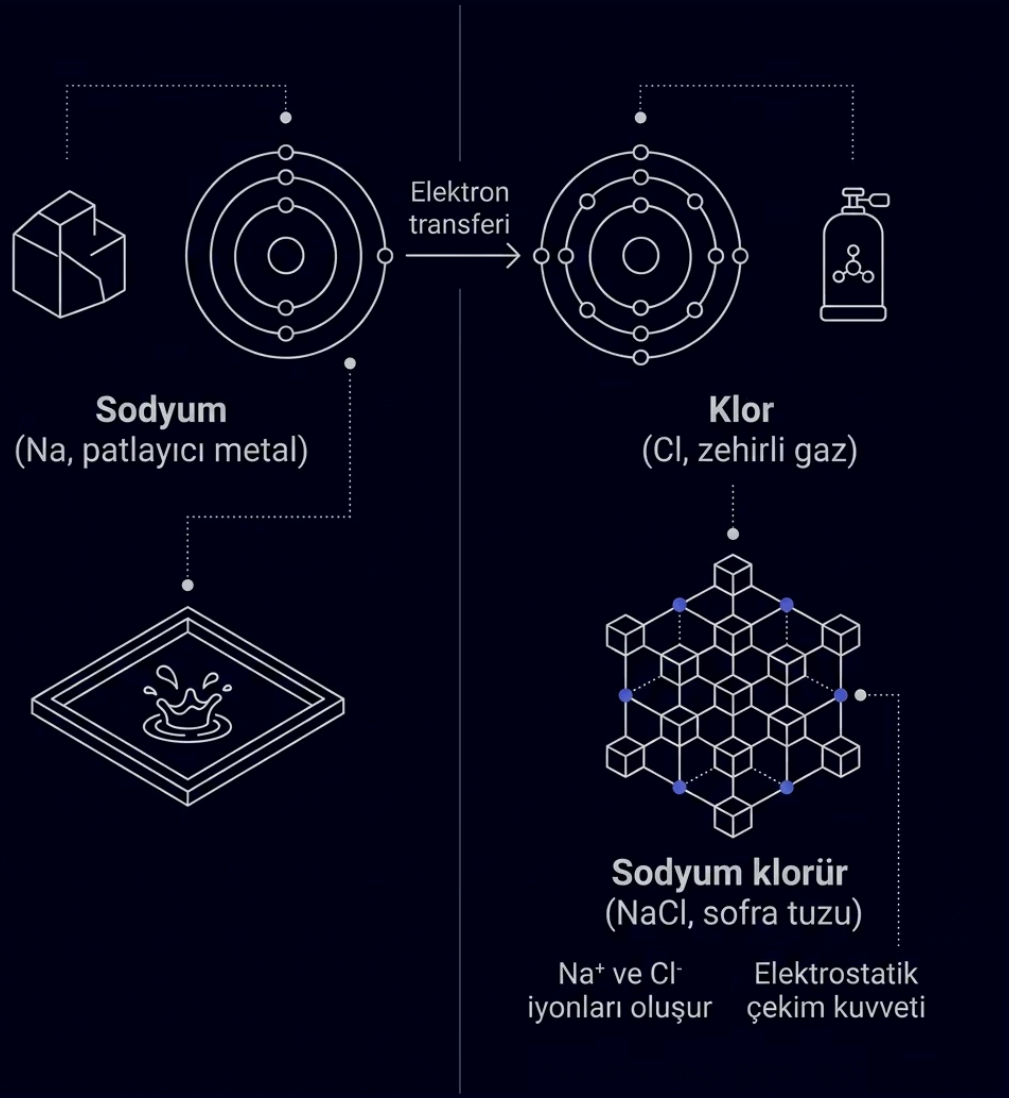
Elektron denizi

### Zayıf Etkileşimler

H bağları, Van der Waals



# İyonik Bağ: Zıtlıkların Uyumu




Metal (elektron veren) ile ametal (elektron alan) arasındaki elektron transferiyle oluşur; zıt yüklü iyonlar elektrostatik kuvvetle birbirini çeker.

### Tezahür (Emergence) örneği:

- Sodyum (Na) → suyla temas ettiğinde patlayan metal
- Klor (Cl) → zehirli sarı-yeşil gaz
- NaCl → yaşamın vazgeçilmezi sofra tuzu

> İki zararlı elementten hayati bir bileşiğin ortaya çıkması, maddedeki potansiyelin tasarlanmış bir sanatla işlendiğinin göstergesidir.

# Kovalent ve Diğer Bağlar

### Kovalent Bağ

Ametal atomlarının elektronları ortaklaşa kullanmasıdır; bağlar yönlüdür (109.5°, 120° vb.). Bu geometrik zorunluluk, DNA sarmalından enzimlerin yapısına kadar biyolojik mimarinin temelidir.

### Metalik Bağ

"Elektron denizi" ile pozitif metal iyonları arasındaki çekim; metallerin elektrik iletmesini ve dövülmesini sağlar.

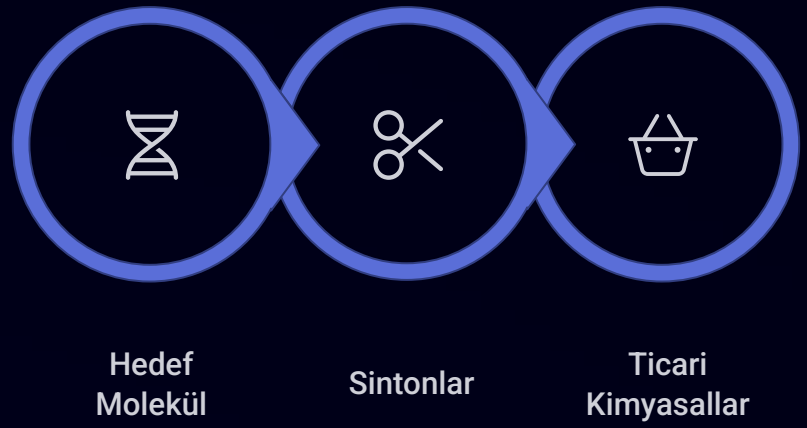
### Zayıf Etkileşimler

Hidrojen bağları ve Van der Waals kuvvetleri — suyun sıvı kalmasını, DNA'nın iki ipliğinin bir arada durmasını ve proteinlerin katlanmasını mümkün kılar.

# Retrosentetik Analiz: Tersten Düşünme Sanatı

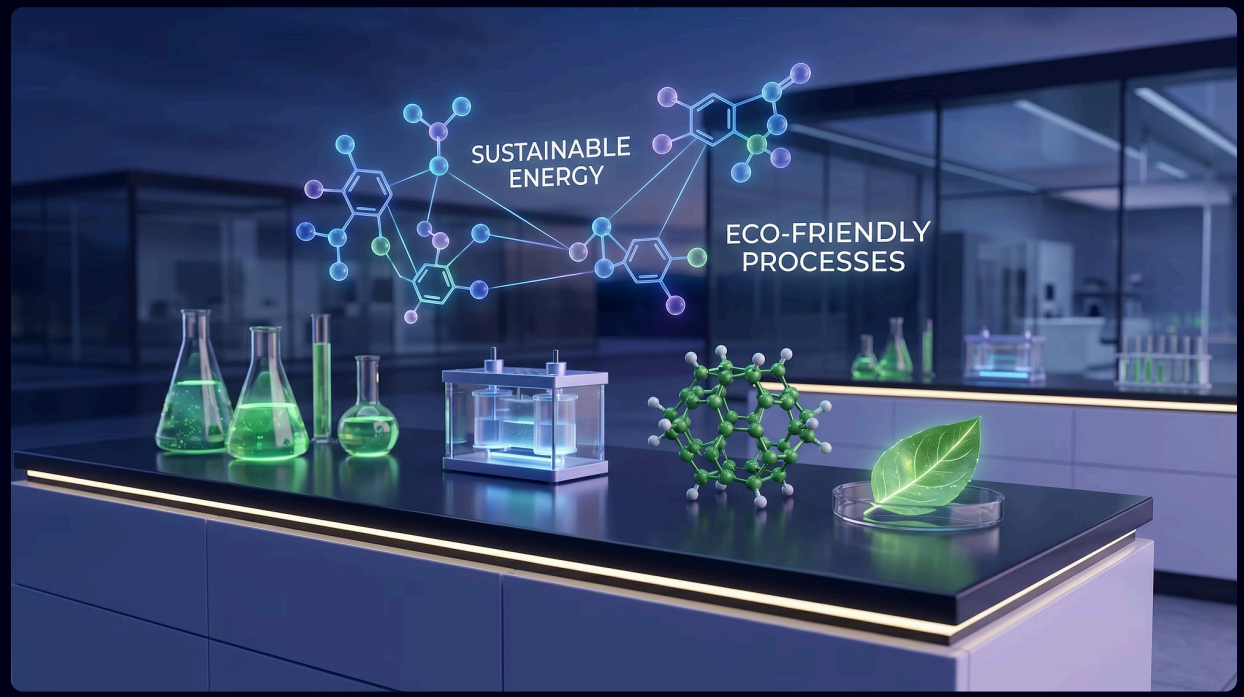
Hedef molekülden geriye doğru giderek, onu daha basit parçalara ayırma yöntemidir.

> **Analoji:** Bir şefin muhteşem pastaya bakıp "hangi malzemelere, hangi sırayla ihtiyacım var?" diye düşünmesi gibi — kimyada bu "retrosentetik ok" (⇒) ile yapılır.




E.J. Corey bu stratejiyi sistemleştirerek Nobel ödülü kazanmıştır.

# Yeşil Kimya: Sürdürülebilir Üretim




12 temel prensip üzerine kurulu modern sentez anlayışıdır.

## Atom Ekonomisi

Bir marangozun kütüğün %90'ını talaş olarak atması "düşük atom ekonomisi"dir. Yeşil kimyanın hedefi, tüm atomların son üründe kullanıldığı, atığın sıfıra yaklaştığı yöntemlerdir.

## Uygulamalar

- Mikrodalga destekli sentez → süre saatlerden dakikalara iner
- Toksik benzen yerine su veya iyonik sıvılar kullanılır
- 2024'te iyonik sıvılarla C-N bağı tepkimelerinde %97 verim elde edilmiştir

# Tık Kimyası (Click Chemistry)

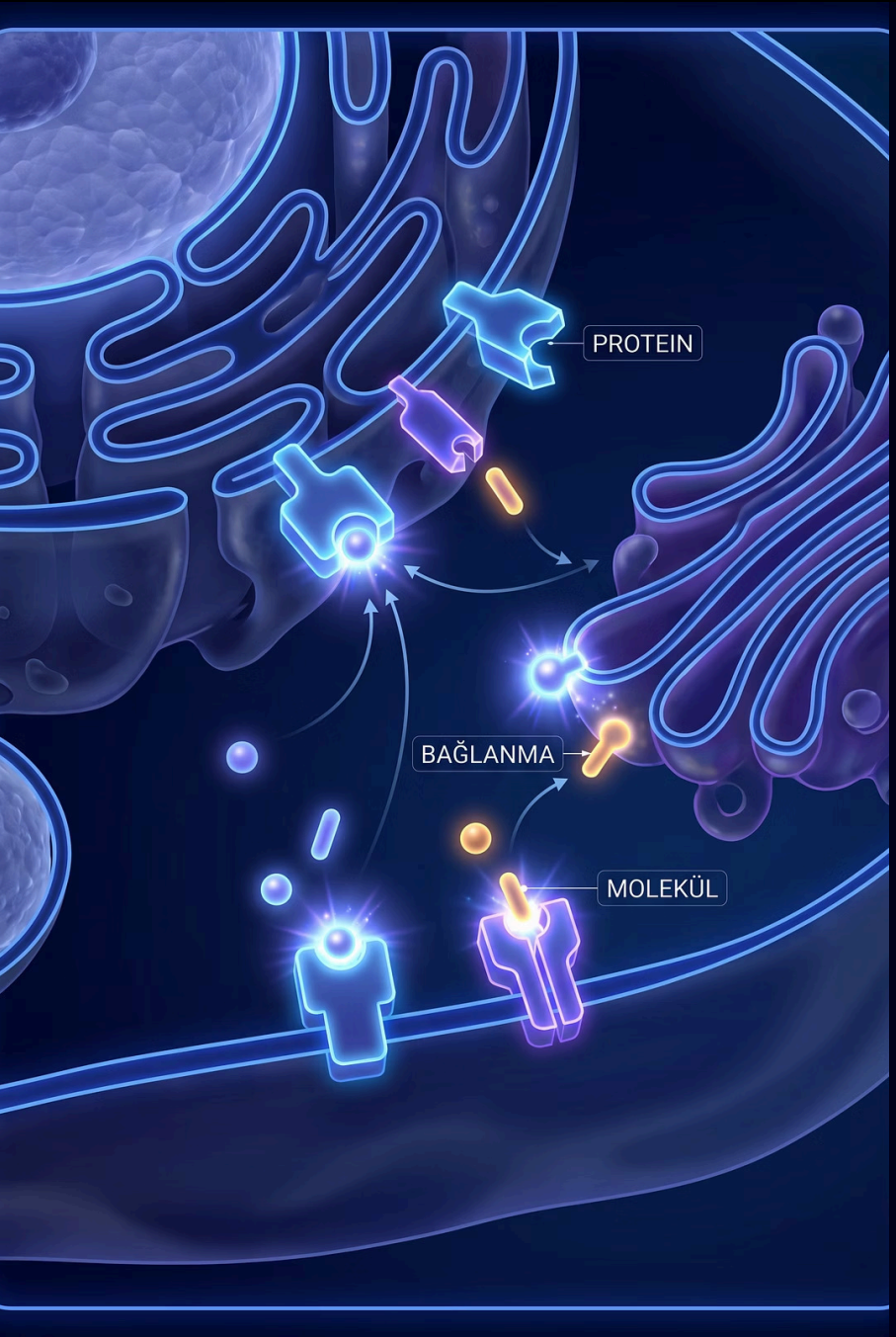
2022 NOBEL KİMYA ÖDÜLÜ

**K. Barry Sharpless, Morten Meldal ve Carolyn Bertozzi'ye 2022 Nobel Kimya Ödülü'nü kazandıran yöntemdir.**

> **Analoji:** İki moleküler parçayı emniyet kemeri tokası gibi — geri dönüşümsüz, sağlam ve tek hamlede — birleştirmek.

## CuAAC Mekanizması:

Başka hiçbir grupla (protein, DNA) etkileşime girmezler → **Biyoortogonallik**



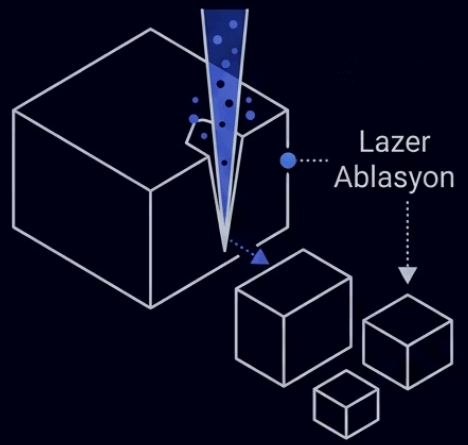

# Biyoortogonallik: Canlı Hücre İçinde Kimya

Tık kimyasının "biyoortogonal" özelliği, canlı hücrelerin içinde hücreye zarar vermeden kimyasal deneyler yapılmasını mümkün kılmıştır.

> Azid ve alkin gruplarının, milyonlarca farklı molekülün bulunduğu bir hücre ortamında yalnızca birbirini tanıyıp birleşecek şekilde tasarlanmış olması, maddedeki seçiciliğin ne denli ileri düzeyde olduğunu ortaya koyar.

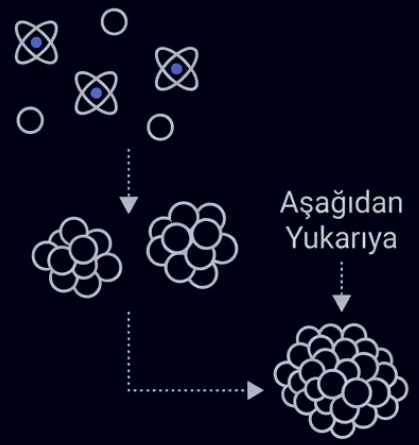
# Nanopartikül Sentezi: İki Yaklaşım

## YUKARIDAN AŞAĞIYA (Top-Down)




**Büyük malzeme lazer ablasyon ile nano boyuta yontulur.**

## AŞAĞIDAN YUKARIYA (Bottom-Up)




**Atomlar teker teker bir araya getirilir.**

## BİYOGENİK SENTEZ

**Palmiye veya çay yaprağı özleri $Ag^+$ iyonlarını nanopartiküle dönüştürür.**

### Yukarıdan Aşağıya (Top-Down)

Büyük malzemeyi yontarak nano boyuta indirmek — lazer ablasyon gibi yöntemler.

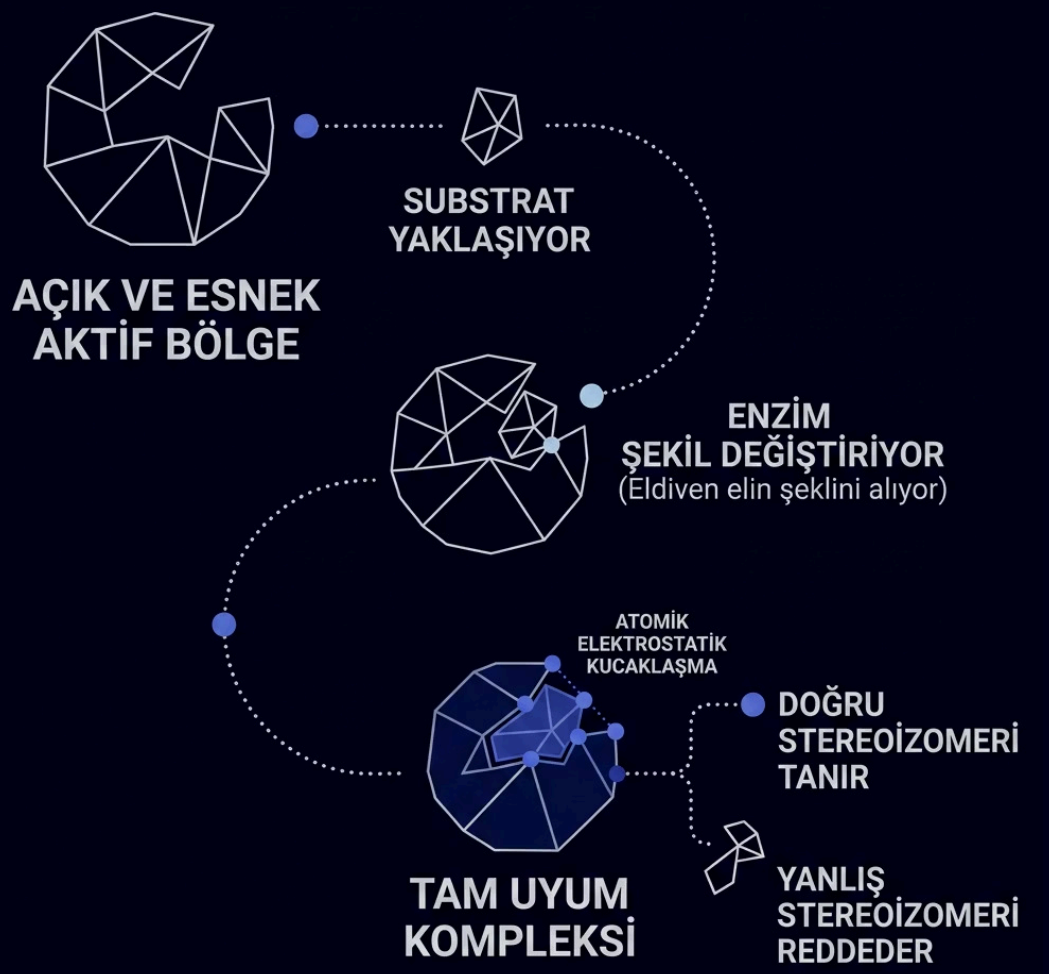
### Aşağıdan Yukarıya (Bottom-Up)

Atomları teker teker bir araya getirerek istenilen boyutta partikül inşa etmek — atomik hassasiyetle kontrol sağlanır.

### Biyojenik Sentez

Palmiye veya çay yaprağı özleri, toksik kimyasal kullanılmadan metal iyonlarını (Ag+) nanopartiküle dönüştürür. Sarı özün kahverengiye dönüşmesi, oluşumun görsel kanıtıdır.

# Enzimlerin Hassas İşleyişi




Enzimler, tepkimeleri sentetik katalizörlerden milyonlarca kat daha hızlı gerçekleştiren biyolojik katalizörlerdir. Asıl önemlisi: seçicilikleridir.

### İndüklenmiş Uyum Modeli (Koshland)

Enzim, substratına yaklaşırken şekil değiştirir — tıpkı eldivenin elin şeklini alması gibi.

Bu uyum yalnızca fiziksel değil, atomik düzeyde elektrostatik ve kimyasal bir kucaklaşmadır. Enzim, substratın yalnızca doğru stereoizomerini tanır; diğerini reddeder.

# Levinthal Paradoksu: Rastlantısallığın Matematiksel İflası

⚠ **Paradoks:** 100 amino asitlik küçük bir proteinin alabileceği yaklaşık $10^{300}$ farklı konformasyon vardır. Saniyede trilyonlarca deneme yapılsa bile doğru şekli bulmak evrenin yaşından trilyonlarca kat uzun sürerdi.

✓ **Gerçek:** Canlılarda proteinler milisaniyeler veya saniyeler içinde hatasız biçimde doğru forma katlanır.

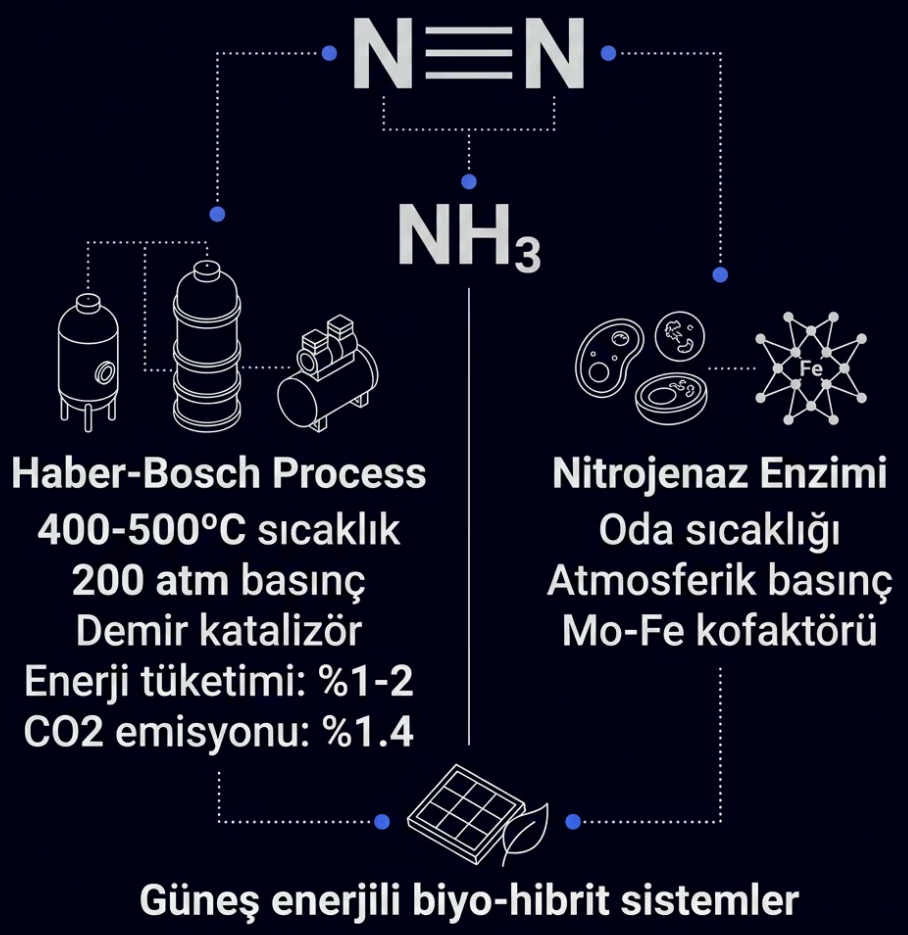
## Bilimsel Açıklama: "Enerji Hunisi" Teorisi

Protein, enerji yüzeyinde en düşük enerjili hale doğru yönlendirilir. Bu yönlendirilme, molekülün yapısına kodlanmış önceden belirlenmiş bir yol haritasının varlığına işaret eder.

# B12 Vitamini: İnsan ile Bakteri Sentezinin Karşılaştırması

| Özellik | Laboratuvar Sentezi | Biyosentez (Bakteri) |
|---|---|---|
| Süre | 12 yıl geliştirme / aylar üretim | Dakikalar / saatler |
| Ekip | 100+ doktoralı araştırmacı | ~30 enzim |
| Basamak | 70+ adım | ~20–30 enzimatik adım |
| Koşullar | Yüksek basınç, organik çözücüler | Oda sıcaklığı, su, nötr pH |
| Verim | Düşük (kümülatif kayıp çok) | Yüksek |

# Azot Fiksasyonu: Haber-Bosch ile Nitrojenaz




Atmosferdeki N2'nin üçlü bağı (N≡N) son derece güçlüdür ve kırılması hayati enerji gerektirir.

### Haber-Bosch (İnsan)

400–500°C, 200 atmosfer basınç, demir katalizör — dünya toplam enerji tüketiminin %1–2'si bu süreçte harcanır; küresel CO2 emisyonunun %1.4'ünden sorumludur.

### Nitrojenaz Enzimi (Bakteri)

Aynı işlem oda sıcaklığında ve atmosferik basınçta, Molibden-Demir kofaktörü aracılığıyla gerçekleştirilir.

### Gelecek

Bilim insanları bugün Nitrojenaz'ı taklit eden güneş enerjili "biyo-hibrit" sistemler geliştirmeye çalışmaktadır.

# Sonuç: Madde, Düzen ve Anlam

Bu derste işlenen her başlık, aynı gerçeğe farklı açılardan işaret etti:

### → IUPAC ve Dijital Sistemler

Maddenin matematiksel düzenini insan aklına çevirir.

### → Tık Kimyası ve Yeşil Kimya

İnsan sentezi, doğadaki modülerliği taklit eder.

### → Enzimler, Levinthal, B12 ve Nitrojenaz

Biyolojik sentez, insan teknolojisinden nitelik ve verimlilik açısından karşılaştırılamaz ölçüde ileridedir.

> Bilimin yönü, doğaya hükmetmekten **doğadan öğrenmeye** dönmektedir. Madde; incelendikçe hayranlık uyandıran, deşifre edildikçe derinleşen ve sentezlendikçe potansiyelini açığa çıkaran muazzam bir eserdir.